

Квантово-химическое изучение влияния заместителей в индольном ядре на энергию диссоциации протонированных трииндолилметанов

Е.Е.Быков, С.Н.Лавренов, М.Н.Преображенская

НИИНА им. Г.Ф.Гаузе РАН, e-mail: evgen-bykow@yandex.ru

Три(индол-4-ил)метаны являются исходными веществами для получения солей три(индол-3-ил)метилия, обладающих высокой цитотоксической активностью. Квантово-химические расчёты методом AM1 и методом B3LYP/6-31G(d) показали, что электронодонорный заместитель в положение 4 индольного цикла протонированного трииндолилметана **I** приводит к понижению теплоты реакции его диссоциации (схема 1), а электроноакцепторный заместитель даёт рост теплоты реакции по сравнению с таковой для незамещённого трииндолилметана. (См. табл.1)

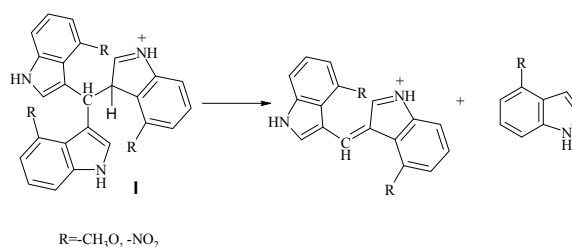


Схема 1. Реакция диссоциации протонированных трииндолилметанов

Таблица 1. Теплоты реакций диссоциации протонированных трииндолилметанов, ккал/моль

Заместитель	ΔE_{AM1}	$\Delta E_{B3LYP/6-31G(d)}$
-H	5.76	-6.53
-OCH ₃	0.37	-15.23
-NO ₂	11.97	-3.13

Работа поддержана грантом НШ-5290-2010.4